第27卷 第4期 工 程 数 学 学 报 Vol. 27 No. 4
2010年08月 CHINESE JOURNAL OF ENGINEERING MATHEMATICS Aug. 2010

文章编号:1005-3085(2010)04-0621-06

图的最大二等分问题的秩二松弛算法的改进

张 芳, 徐成贤

(西安交通大学理学院，西安 710049)

摘 要: 本文在吸取半定规划松弛和秩二松弛方法的优点，克服其缺点的基础上，针对模型目标函数非凸的特点，提出了图的最大二等分问题的秩二松弛模型。由于该模型变量的数目没有增加，因此该方法对求解大规模问题很有优势。数值实验表明，这种算法无论是与半定规划松弛还是原秩二松弛算法相比，在获得目标函数值相当的情况下，运行时间较短。

关键词: 图的最大二等分问题；秩二松弛；拟Newton法

分类号: AMS(2000) 90C27; 90C59 **中图分类号**: O221.2 **文献标识码**: A

1 引言

给定无向图$G=(V,E)$和权值对称矩阵$W=(w_{ij})_{n\times n}$，其中$V=\{1,2,\cdots,n\}$为节点集合，E为边集合，如果$(i,j)\in E$，定义在此边上的非负权值为$w_{ij}=w_{ji}$，否则$w_{ij}=0$。图的最大二等分问题就是把节点分成个数相同的两部分S和$\bar{S}=V\backslash S$(这里n是偶数)，使得两节点分别在S, $\bar{S}$中的边的权值w_{ij}的总和最大。引入二值变量x_i，$i=1,2,\cdots,n$。若$i\in S$，记$x_i=1$；若$i\in\bar{S}$，记$x_i=-1$。记$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，$e\in R^n$表示元素全为1的列向量，则图的最大二等分问题可以表述为

$$w^*=\max\sum_{i,j}\frac{1}{4}w_{ij}(1-x_ix_j)$$

$$\text{s.t.}\quad\sum_{i=1}^{n}x_i=0,\quad x_i\in\{-1,1\},\quad i=1,2,\cdots,n.\tag{1}$$

图的最大二等分问题属于组合优化问题，它在组合优化中起着非常重要作用，在网络优化，工程技术中也有着广泛的应用背景，许多网络问题都可以转化为图的最大二等分问题，例如超大规模集成电路(VLSI)的设计技术等。由于该问题很难获得精确的解，是NP-hard问题。近年来，人们已经不满足常规算法求解复杂问题，提出了各种启发式近似算法，其中松弛算法就是非常重要的一种。建立在半定规划(SDP)松弛基础上的随机近似算法可以在多项式时间内获得原问题的一个好的上界，该算法对于图的节点不太多时表现得很有效，但是随着图的节点数目的增加，转化所得的半定规划松弛模型变量的数目呈几何级数增加，这给问题的求解带来了难度。

Burer等[1]提出了最大割问题的秩二松弛算法，其中求解图的最大割问题的秩二松弛模型时使用的是最速下降法，理论分析和实际计算表明，最速下降法的效果是很不理想的。本文吸取半定规划松弛及秩二松弛方法的优点，克服其缺点的基础上，提出图的最大二等分问题的秩二

收稿日期: 2009-07-15. **作者简介**: 张芳(1972年9月生)，女，博士，讲师. 研究方向：随机优化的理论、算法及其在金融中的应用.

松弛方法，由于图的最大二等分问题的秩二松弛模型变量的数目没有增加，所以这种松弛方法对求解大规模问题就很有优势。但是该模型导致目标函数非凸，本文针对该模型的特性，提出一种改进的求解方法。数值实验表明，这种方法是有效的，与半定规划松弛方法相比，获得的原问题的近似最优值相近的情况下，运行时间较短。与原秩二松弛算法相比，改进的秩二松弛算法获得目标函数值相当的情况下，运行时间较短。

2 图的最大二等分问题的秩二松弛模型及特性

首先给出图的最大二等分问题的秩二松弛模型。我们用单位向量 $v_i \in R^2$ 代替式 (1) 中的标量 x_i，用向量内积 $v_i^T v_j$ 代替标量 $x_i x_j$，于是限制条件 $x_i \in \{-1,1\}$ 就变为 $\|v_i\|_2 = 1$，其中 $\|v_i\|_2$ 表示向量 v_i 的 2-范数。这样，所有的向量 v_i 都在 R^2 的单位圆上。由于 v_i 是二维单位向量，故可以在极坐标系下设

$$v_i = \begin{pmatrix} \cos\theta_i \\ \sin\theta_i \end{pmatrix}, \quad i = 1,2,\cdots,n.$$

于是由这 n 个单位向量 $v_1, v_2, \cdots, v_n \in R^2$，可以形成一个 n 维向量 $\theta = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_n)$，而且对任意的 $i, j = 1,2,\cdots,n$，$v_i^T v_j = \cos(\theta_i - \theta_j)$。若定义对称矩阵 $Y(\theta) : Y(\theta) = (\cos(\theta_i - \theta_j))_{n\times n}$，则对任意的 $\theta \in R^2$ 可以定义

$$f(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}\cos(\theta_i - \theta_j), \tag{2}$$

又因为 $(e^T x)^2 = (ee^T) \bullet (xx^T) = e^T X e = 0$ 成立，其中 $X = xx^T = (x_i x_j)_{n\times n}$，用矩阵 $Y(\theta)$ 代替 X，于是图的最大二等分问题可以转化为

$$\begin{aligned} \min\quad & \frac{1}{2} f(\theta) \\ \text{s.t.}\quad & e^T Y(\theta) e = 0, \end{aligned} \tag{3}$$

该松弛模型可以看做是用秩二限制 $\mathrm{rank}(Y) \le 2$ 代替半定规划松弛模型中的秩一限制，因此称为图的最大二等分问题的秩二松弛模型。该模型是一个具有 n 个变量的约束最优化问题，也就是说变量的数目没有增加，这正是该松弛方法的优越之处。

下面分析秩二松弛模型的特性。函数 $f(\theta)$ 的二阶偏导数为

$$\frac{\partial^2 f(\theta)}{\partial\theta_i \partial\theta_j} = \begin{cases} w_{ij}\cos(\theta_i - \theta_j), & 若\ i \ne j, \\ -\sum\limits_{k\ne j} w_{kj}\cos(\theta_k - \theta_j), & 若\ i = j. \end{cases}$$

于是有

$$G(\theta) = \nabla^2 f(\theta) = W \circ Y(\theta) - \mathrm{Diag}\big([W \circ Y(\theta)]e\big), \tag{4}$$

其中“∘”代表 Hadamard 内积，即矩阵相应元素的乘积形成的矩阵；$\mathrm{Diag}(z)$ 表示由向量 z 的分量作为对角元素形成的对角矩阵。由 (4) 式可知目标函数 $f(\theta)$ 的 Hessian 矩阵 $G(\theta)$ 奇异，所以图的最大二等分问题的秩二松弛模型的目标函数非凸，不能保证获得原问题最优值的一个界，为此本文通过增加迭代次数和对初始值的扰动来提高目标函数的值。

3　秩二松弛算法

Goemans和Williamson在文献[6]中求解图的最大割问题时提出了随机化方法，而且他们还证明：如果图的所有权值非负，用此随机化方法产生的割值的数学期望至少是最大割值的0.87856倍。本文仍采用Goemans和Williamson的随机化方法。假定我们从模型(3)中获得局部(或全局)极小点θ，定义相应于θ的二等分值记为

$$\psi(\theta)=\sum_{i,j}\frac{1}{4}w_{ij}\big(1-\cos(\theta_i-\theta_j)\big). \tag{5}$$

由三角函数的周期性知，对于θ的每一个分量一致旋转一个角度τ，函数$f(\theta)$的值不变，即对任意的$\tau\in R$，$f(\theta)=f(\theta+\tau e)$，也就是说$f(\theta)$是关于每一个分量$\theta_i$的周期函数，周期为$2\pi$。一般地，可设$\theta_i\in[0,2\pi)$，$i=1,2,\cdots,n$ (n是偶数)，且$\theta_1\le\theta_2\le\cdots\le\theta_n$。我们取整数$k\in[1,n/2)$，令

$$x_i=\begin{cases}1, & 若\ i\in[k,k+n/2),\\ -1, & 其它.\end{cases} \tag{6}$$

这样得到的$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$满足图的二等分条件，记相应的二等分的值为

$$r(x)=\sum_{i,j}\frac{1}{4}w_{ij}(1-x_ix_j), \tag{7}$$

为了十分有效地取遍(6)式所有可能值k，并找出最好的二等分，则可以利用下述程序来实现：

步骤1　输入$\theta\in R^n$，满足$\theta_i\in[0,2\pi)$，$i=1,2,\cdots,n$，并且$\theta_1\le\theta_2\le\cdots\le\theta_n$，令$MB=0$，$k=1$；

步骤2　由(6)产生一个等分割x，并由(7)计算$r(x)$；

步骤3　若$r(x)>MB$，则令$MB=r(x)$，$x^*=x$，否则，转步骤4；

步骤4　若$k>n/2-1$，则停止计算，否则$k=k+1$，转步骤2。

从上述程序可以看出来，由程序产生的二等分仅仅依赖于R^2中单位圆上的点的顺序，而不是这些点的实际位置。模型(3)中的约束只是对点的位置限制，而对他们的顺序没有起到约束作用，因此没有必要求解约束松弛模型(3)，而直接求解去掉约束条件的松弛模型，这样仍然有可能产生相同或更好的二等分，并且花费的时间要短。

按照Goemans和Williamson的理论，由程序得到的二等分值$r(x^*)$至少是秩二松弛模型的最优解θ对应的二等分值$\psi(\theta)$的0.87856倍，即$r(x^*)\ge 0.87856\psi(\theta)$。由于不能保证$\psi(\theta)$是最大二等分值的一个上界，无法得到算法具体的近似比。但是在某种程度上可以保证，我们获得的$\psi(\theta)$的局部极大(或者说$f(\theta)$的局部极小)越好，产生的二等分值就可能越好。

采用Newton法求解无约束优化问题需要计算目标函数的Hessian矩阵G_k和求解线性方程组$\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}=-\nabla f(x^{(k)})$，计算量大。而拟Newton法中BFGS校正公式是迄今最好的拟Newton公式，对于一般的函数，它都具有很好的性质。它是由$f(x)$的函数值和一阶导数值构造对称矩阵B_k来近似代替Hessian阵G_k，并由方程$d^{(k)}=-B_k^{-1}g_k$来确定搜索方向，避免了Hessian阵的计算。为了减少工作量，避免求解线性方程组$d^{(k)}=-B_k^{-1}g_k$来确定搜索方向$d^{(k)}$，记$H_k=B_k^{-1}$，则$d^{(k)}=-H_kg_k$，记$H_{k+1}=H_k+\Delta H_k$，ΔH_k是修正矩阵，并要求H_{k+1}满足拟Newton条件$H_{k+1}y^{(k)}=s^{(k)}$，于是得到关于H_k的BFGS公式

$$H_{k+1}=H_k+\left(1+\frac{y^{(k)T}H_ky^{(k)}}{y^{(k)T}s^{(k)}}\right)\frac{s^{(k)}s^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}-\frac{H_ky^{(k)}s^{(k)T}+(H_ky^{(k)}s^{(k)T})^T}{y^{(k)T}s^{(k)}}, \tag{8}$$

设 H_k 是对称正定矩阵，$y^{(k)T}s^{(k)} > 0$，则由式 (8) 得 H_{k+1} 仍是正定矩阵，且当初始矩阵 H_0 正定时，对一切的 k, H_k 是正定矩阵，从而保证了拟 Newton 方向 $d^{(k)}$ 总是下降方向。于是有 BFGS 拟 Newton 法：

步骤 1 输入 $x^{(0)}$, $H_0 = I$, $k = 0$;

步骤 2 如果满足某终止条件，则输出 $x^{(k)}$，停止，否则 $d^{(k)} = -H_k g_k$;

步骤 3 进行线性搜索获得步长 α_k，令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$;

步骤 4 计算 $y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})$, $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$;

步骤 5 由 (8) 式计算 H_{k+1};

步骤 6 $k = k + 1$，转步骤 2。

大量的数值实验表明 BFGS 方法与低精度的线性搜索方法结合使用，能收到较好的计算结果。因此在确定了搜索方向之后，本文选择非精确线性搜索 Armijo 试探法[5] 确定步长 α_k。这样我们就可以根据秩二松弛模型 (3)，BFGS 拟 Newton 法及上述程序建立改进的图的最大二等分问题的启发式近似算法：

步骤 1 输入 N，N 是迭代次数，$\theta^{(0)} \in R^n$, $l = 1$, $MB = 0$;

步骤 2 以 $\theta^{(0)}$ 为初始点，用 BFGS 方法解去掉约束条件的松弛模型 (3)，得到 $f(\theta)$ 的极小点 θ;

步骤 3 由程序计算一个关于 θ 的图的最好的二等分 x，由 (7) 计算 $r(x)$;

步骤 4 若 $r(x) > MB$，则令 $MB = r(x)$, $x^* = x$，否则，转步骤 5;

步骤 5 若 $l > N$，则停止，否则随机取 $\Delta\theta \in R^n$，令 $\theta = \theta + \Delta\theta$, $l = l + 1$，转步骤 3。

4 数值实验

本文采用 BFGS 方法求解去掉约束条件的松弛模型 (3)，得到 $f(\theta)$ 的极小点，取终止条件为

$$\left\|\nabla f(\theta^{(k)})\right\| < 10^{-4}, \quad \left\|\theta^{(k+1)} - \theta^{(k)}\right\| \le 10^{-4}\left(1 + \|\theta^{(k)}\|\right),$$

取 H_0 为单位矩阵。采用非精确线性搜索 Armijo 试探法确定步长，取 $\beta = 0.75$, $\mu = 0.2$, $\gamma = 6$。将算法用 Matlab 6.5 编程，取 θ^0 为随机向量。做如下数值实验，w 表示近似最优解，Cpu(s) 表示 CPU 运行时间 (秒)，N 是迭代次数。

首先考虑文献中出现的几个问题，问题 1：文献 [2] 中的一个图。问题 2：文献 [3] 中的一个图。问题 3：图为 20 个点 19 条边的一条路径。问题 4：10 个节点的两个完全图之间用一条边连接形成的图。问题 5：一个六角星图 (节点 1 与节点 2, 5, 6 连接；节点 2 与 3, 6 连接；节点 3 与 4, 6 连接；节点 4 与 5, 6 连接；节点 5 与 6 连接)。问题 6：文献 [4] 中的一个图。对于这几个问题，如果节点间有边连接，则权值为 1，否则为 0。由于版面的限制，本文只给出参考文献，不再另附表说明。数值实验结果见表 1。从表 1 中可以看出，对于图的最大二等分问题，除了问题 3，用秩二松弛算法得到的近似最优值都要好，运行时间一致较短。

其次选取 W 为随机生成的稀疏权值对称矩阵，并用 2 代替非零元素，将秩二松弛算法与改进的算法作比较，运行结果如表 2。从表 2 中可以看出，秩二松弛算法与改进的秩二松弛算法相比，节点数为 200 时秩二松弛算用了相当长的时间，运行过程中出现条件数较大的警告，但改进算法运行时间并不长；总体上说，节点数为 400 时得到的目标函数值稍微差一点，但是运行时间一致较短，而且对于图的节点数越多，改进算法的效果越明显。

表 1: 文献中的几个问题的数值实验结果

问题	半定松弛算法		秩二松弛算法 ($N=1$)		改进的秩二松弛算法 ($N=8$)	
	w	Cpu(s)	w	Cpu(s)	w	Cpu(s)
问题 1	37	2.6	38	2.0530	38	0.1710
问题 2	37	2.9	38	1.8631	38	0.1302
问题 3	19	3.6	19	5.2576	18	0.1401
问题 4	51	2.2	51	0.4707	51	0.0601
问题 5	7	2.1	7	0.1703	7	0.0100
问题 6	38	2.2	42	0.8512	41	0.0801

表 2: 秩二松弛算法与改进的秩二松弛算法的比较

图	秩二松弛算法 ($N=1$)		改进的秩二松弛算法 ($N=1$)	
n	w	Cpu(s)	w	Cpu(s)
10	46	0.731	46	0. 160
20	172	1.342	192	0.080
30	402	2.984	402	0.040
40	704	2.835	704	0.061
50	1198	16.804	1198	0.180
60	1598	18.257	1598	0.181
80	2808	82.418	2808	0.330
100	4386	144.178	4368	0.441
200	17472	1110.239	17476	1.873
300	39180	506.800	39184	5.237
400	69296	826.012	69290	10.445
500	108458	928.634	108454	19.028

5 结论

由于图的最大二等分问题的秩二松弛模型变量的数目没有增加，所以这种松弛方法对求解大规模问题很有优势，但是秩二松弛模型导致目标函数非凸，不能保证获得原问题最优值的一个上界，为此通过增加迭代次数和对初始值的扰动来改善目标函数的值。数值实验结果表明，对相同的测试问题，与半定规划松弛算法相比，用秩二松弛算法获得的目标函数值相差不大，但是该算法运行时间比半定松弛算法要短；与原秩二松弛算法相比，改进的算法获得目标函数值相当的情况下，运行时间较短。

参考文献：

[1] Samuel Burer, Renato D C Monteior, Zhang Y. Rank-two relaxation heuristics for Max-cut and other binary quadratic programs[R]. Technical Report TR00-33, Department of Computational and Applied Mathematics, Rice University Houston. Texas 77005, November 2000

[2] Rendle F, Wolkowicz H. A projection technique for partitioning the nodes of a graph[R]. Technical Report 20, University of Waterloo, 1990

[3] Cullum J, Edonath W, Wolfe P. The minimization of certain non-differentiable sums of eigenvalue of symmetric matrices[J]. Mathematical Programming Study, 1975, (3): 35-55

[4] Barnes E R, Hoffman A J. Partitioning, Spectra and Linear Programming[M]. New York: Academic Press, 1984

[5] 徐成贤，陈志平，李乃成. 近代优化方法[M]. 北京：科学出版社，2002
Xu C X, Chen Z P, Li N C. Modern Optimization Method[M]. Beijing: Science Press, 2002

[6] Goemans M X, Willimson D P. Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming[J]. Journal of ACM, 1995, 42: 1115-1145

Improvement on the Rank-two Relaxation Algorithm for the Graph Max-bisection Problem

ZHANG Fang, XU Cheng-xian

(School of Science, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

Abstract: A rank-two relaxation model is proposed for the graph max-bisection problem. The approach is based on theories of SDP and rank-two relaxation approaches, and the approach utilizes the character that the objective function is non-convex in the model. Since the number of variables does not increase, this approach is suitable for large-scale problems. Extensive numerical experiments show that, compared with the SDP and the original rank-two relaxation approaches, our algorithm need less time to approach the similar value of objective function.

Keywords: graph max-bisection problem; rank-two relaxation; quasi-Newton method

Received: 15 July 2009. **Accepted:** 03 Mar 2010.